

Pressemitteilung

Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen

Thorsten Karbach

30.07.2024

<http://idw-online.de/de/news837601>

Forschungsergebnisse
Chemie
überregional



Chemische Bindung von Phasenwechselmaterialien

Im Prinzip ist das Wesen der chemischen Bindung seit etwa 100 Jahren bekannt, und zwar basierend auf der Quanten- oder Wellenmechanik. Vereinigen sich Atome zu größeren Verbänden (Moleküle), dann wechselwirken sie miteinander über sogenannte elektronische „Wellenfunktionen“. Im Falle des Wassermoleküls H_2O wechselwirken also die Wellenfunktionen eines Sauerstoffatoms (O) und zweier Wasserstoffatome (H).

Aus der Alltagserfahrung wissen wir, dass sich Wellen entweder aufschaukeln oder auslöschen können, und ganz analog „interferieren“ auch atomare Wellenfunktionen, also kommt es entweder zur Verstärkung (Bindung von Atomen) oder Auslöschung (Abstoßung von Atomen). In der Veröffentlichung „Chemical bonding in phase-change chalcogenides“ beschreiben Dr. Peter Müller und Professor Richard Dronskowski, Institut für Anorganische Chemie der RWTH, zusammen mit Kollegen der Universität Oxford und des FZ Jülich, die chemische Bindung in komplizierten Phasenwechselmaterialien, die üblicherweise Germanium, Antimon und Tellur enthalten.

Die Wissenschaftler fanden heraus, dass die chemische Bindung der o.g. technologisch relevanten Speichermaterialien (elektronisch bzw. optisch) nicht neu, sondern bereits seit Jahrzehnten aus analogen molekularen Verbindungen bekannt ist. Alle chemischen Verbindungen dieser Art weisen einen chronischen Elektronenüberschuss aus und müssen das Zuviel an Elektronen über mehr als zwei Atome umverteilen. Also interferieren mindestens drei (nicht zwei) Atome miteinander, und es kommt zu genau den physikalischen Eigenschaften, die technologisch von Interesse sind. Insbesondere konnten die Wissenschaftler auf Basis quantenmechanischer Rechnungen die räumliche Gestalt der relevanten elektronischen Wellenfunktionen erstmals graphisch darstellen. Die quantenchemische Natur dieser Bindung ist insofern geklärt, und rationale Synthesen neuer Materialien sind sehr viel leichter möglich. Die Arbeit der Aachener Chemiker und ihrer Kollegen ist im renommierten Journal „Journal of Physics: Condensed Matter“ erschienen.

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Dr. rer. nat. Richard Dronskowski
RWTH Aachen

Lehrstuhl für Festkörper- und Quantenchemie und Institut für Anorganische Chemie
Mail: drons@halg000.ac.rwth-aachen.de

Originalpublikation:

DOI [10.1088/1361-648X/ad46d6](https://doi.org/10.1088/1361-648X/ad46d6)